NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

Professor Per Hemmer, tel. 73 59 36 48

EKSAMEN I SIF4045 KVANTEMEKANIKK

Tirsdag 1. august 2000
kl. 09.00 – 14.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling

En side med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller 22. august 2000.

Oppgave 1

a) La $\Psi(\vec{r},t)$ være bølgefunksjonen til en partikkel med masse m i potensialet $V(\vec{r})$. Skriv ned den tidsavhengige Schrödingerlikning for Ψ. Hva er en stasjonær tilstand?

b) Vis at for en partikkel i det éndimensjonale harmonisk-oscillator-potensialet

$$V(x) = \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2$$

er

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

en normert egenfunksjon med energiegenverdi $\frac{1}{2}\hbar\omega$ (grunntilstanden).

c) I Rayleigh-Schrödinger tidsuavhengig perturbasjonsteori for et system med Hamiltonoperator $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \lambda \widehat{H}_1$ løses egenverdiproblemet $\widehat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ ved rekkeutvikling i parameteren λ:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots \\ |\psi_n\rangle &= |n\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \ldots \end{aligned}$$

Løsningen av det uperturberte problemet, $\widehat{H}_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, forutsettes kjent, og det forutsettes at egenverdiene E_n^0 ikke er degenererte.

Vis at til første orden er egenverdiene gitt ved

$$E_n = E_n^0 + \lambda \langle n|\widehat{H}_1|n\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2).$$

d) En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt potensial

$$V(x) = \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \lambda x^6,$$

der ω og λ er ikke-negative konstanter.

Når $\lambda = 0$ er grunntilstandsenergien i potensialet lik $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Hva er grunntilstandsenergien til første orden i λ?

e) Vis at grunntilstandsenergien E_0 for en partikkel med masse m i et éndimensjonalt potensial $V(x)$ aldri er større enn Rayleigh-Ritz-estimatet

$$E_{RR} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} f^* \, \widehat{H} \, f \; dx}{\int_{-\infty}^{\infty} f^* \, f \; dx} = \frac{\langle f|\widehat{H}|f\rangle}{\langle f|f\rangle}.$$

f) Benytt Rayleigh-Ritz variasjonsmetode med prøvefunksjonen

$$f(x) = e^{-\frac{1}{2}\tau x^2},$$

der τ er en variasjonsparameter, til å beregne energien i grunntilstanden i potensialet

$$V(x) = \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \lambda x^6$$

best mulig.

Dersom en sammenlikner følgende tre verdier for grunntilstandsenergien: perturbasjonsresultatet $E_0^0 + \lambda E_0^{(1)}$ fra punkt d), variasjonsresultatet E_{RR} fra punkt f) og den ukjente eksakte verdi E_0, hvilken av disse tre verdiene vil være lavest, og hvilken vil være høyest? Gi en kort begrunnelse for svaret.

Et rent sjettegradspotensial får vi ved å sette $\omega = 0$. I dette spesialtilfellet vil estimatet for grunntilstandsenergien øke som en potens av λ, dvs $E_{RR} \propto \lambda^z$. Bestem potensen z.

Oppgave 2

a) $\widehat{\vec{J}}_1$ og $\widehat{\vec{J}}_2$ er dreieimpulsoperatorer for to ulike frihetsgrader slik at operatorene kommuterer. Er summen $\widehat{\vec{J}}_1 + \widehat{\vec{J}}_2$ og differansen $\widehat{\vec{J}}_1 - \widehat{\vec{J}}_2$ dreieimpulsoperatorer? (Svaret må begrunnes).

b) Den totale dreieimpulsen $\vec{J}$ til et elektron er $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, der $\vec{L}$ er banedreieimpulsen og $\vec{S}$ er spinnet. Betegn kvantetallene for $\vec{L}^2$, L_z, $\vec{S}^2$, S_z, $\vec{J}^2$ og J_z med henholdsvis ℓ , m, $s = \frac{1}{2}$, m_s, j og m_j.

Anta nå at $\ell = 1$. Hvilke verdier er da mulige for j og m_j? Vis at tilstanden

$$|\psi\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\ell = 1, m = 1, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\ell = 1, m = 0, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle$$

er en egentilstand for $\vec{J}^2$ og J_z, og finn egenverdiene som hører til, f.eks. ved hjelp av relasjonen

$$\left(\vec{L} + \vec{S}\right)^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + L_+S_- + L_-S_+ + 2L_zS_z.$$

I denne tilstanden, hva er sannsynligheten for å finne $m_s = \frac{1}{2}$, ("spinn opp")?

Oppgave 3

Vi betrakter elastisk spredning av partikler med en gitt energi $E = \hbar^2k^2/2m$ mot et fiksert spredningssentrum med vekselvirkning $V(\vec{r})$.

a) Gi en fysisk definisjon av det differensielle spredningstverrsnittet $d\sigma/d\Omega$ for elastisk spredning av partikler mot et fast spredende potensial.

b) For et kulesymmetrisk potensial $V(r)$ kan spredningsamplituden skrives som en sum av partialbølger,

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right)\; P_\ell(\cos\vartheta),$$

der P_ℓ er Legendre-polynomer, og der faseendringen δ_ℓ er definert ved at for store avstander r fra spredningssentret er løsningen av radiallikningen av formen

$$R_\ell(r) \propto \frac{1}{r}\;\sin(kr - \tfrac{1}{2}\ell\pi + \delta_\ell).$$

Finn den tilsvarende partialbølgeutvikling for det totale spredningstverrsnitt σ.

c) Anta at potensialet har en endelig rekkevidde a. Argumenter halvklassisk for at bare ledd med $l < ka$ bidrar vesentlig til summen ovenfor. Hva kan en på grunnlag av dette slutte om vinkelavhengigheten i lavenergetisk spredning, dvs for $E \ll \hbar^2/(2ma^2)$?

d) La potensialet være hard-kjerne-frastøtning,

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \le a \\ 0 & r > a. \end{cases}$$

Finn faseendringen δ_0 for dette potensialet. Beregn i lavenergi-grensen det totale spredningstverrsnitt σ på dette potensialet.

Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Harmonisk oscillator

De to laveste energiegentilstandene har følgende energiverdier og posisjonsbølgefunksjoner:

$$\begin{aligned} E_0 &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega & \langle q|0\rangle &= \psi_0(q) = \left(\tfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ E_1 &= \tfrac{3}{2}\hbar\omega & \langle q|1\rangle &= \psi_1(q) = \left(\tfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} 2xe^{-\frac{1}{2}x^2}, \end{aligned}$$

der $x \equiv q\sqrt{m\omega/\hbar}$.

Uttrykt ved posisjons- og impuls-operatorene er senke- og heveoperatorene definert ved

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\widehat{q} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\widehat{p} \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\widehat{q} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\widehat{p} \end{aligned}$$

Disse stigeoperatorene har egenskapene

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \end{aligned}$$

der $|n\rangle$ er egentilstand nr. n. All tidsavhengighet er neglisjert.

Dreieimpuls

Kommutatorer: $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$; med syklisk indeksbytte.

Stigeoperatorene $L_\pm = L_x \pm iL_y$ og $S_\pm = S_x \pm iS_y$ tilfredsstiller

$$\begin{aligned} L_\pm|l,m,m_s\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\;|l,m\pm 1,m_s\rangle \\ S_\pm|l,m,m_s\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s\pm 1)}|l,m,m_s\pm 1\rangle \end{aligned} \tag{1}$$

Radiallikningen

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_\ell) + \left[k^2 - 2m\hbar^{-2}V(\vec{r}) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right](rR_\ell) = 0.$$

Integraler

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}\, e^{-ax^2}\, dx = c_n a^{-n-\frac{1}{2}}\sqrt{\pi},$$

der

$$c_0 = 1,\;\; c_1 = \tfrac{1}{2},\;\; c_2 = \tfrac{3}{4},\;\; c_3 = \tfrac{15}{8}.$$

$$\int_0^\pi P_\ell(\cos\vartheta)P_{\ell'}(\cos\vartheta)\;\sin\vartheta\; d\vartheta = \int_{-1}^{1} P_\ell(x)P_{\ell'}(x)\; dx = \begin{cases} 0 & \text{for } \ell \neq \ell' \\ \dfrac{2}{2\ell+1} & \text{for } \ell = \ell' \end{cases}$$